Общий вид решения уравнения Шредингера

в центрально симметричном поле

Е.Г. Якубовский

e-mail yakubovski@rambler.ru

Уравнение Шредингера имеет решение для частных случаев потенциала. Получим его решение в общем виде при произвольном потенциале, зависящем от модуля радиуса.

Уравнение Шредингера при произвольном потенциале, зависящем от радиуса, приводится к виду относительно безразмерных коэффициентов см. [1]

$$\frac{d^2R}{dr^2}+\frac{2}{r}\frac{dR}{dr}+R[2E-2U(r)-\frac{l(l+1)}{r^2}]=0. \qquad (1)$$

Используем равенство $\frac{d^2R}{dr^2}=R[\frac{d^2\ln R}{dr^2}+(\frac{d\ln R}{dr})^2]$. Подставляя равенство в уравнение (1), получим

$$\frac{d^2\ln R}{dr^2}+(\frac{d\ln R}{dr})^2+\frac{2}{r}\frac{d\ln R}{dr}+2E-2U(r)-\frac{l(l+1)}{r^2}=0. \quad (2)$$

Сделаем подстановку $k(r)=\frac{d\ln R(r)}{dr}$, получим уравнение

$$\frac{dk}{dr}+k^2+\frac{2k}{r}+2E-2U(r)-\frac{l(l+1)}{r^2}=0$$

Определим линейную часть решения по формуле $k(r)=\frac{c}{r^2}$. Получим дифференциальное уравнение относительно новой переменной

$$\frac{dc}{dr}+\frac{c^2}{r^2}+2Er^2-2U(r)r^2-l(l+1)=0. \qquad (3)$$

Найдем решение нелинейного уравнения $\frac{1}{c}-\frac{1}{c_0}=\frac{1}{r_0}-\frac{1}{r}$. Разрешим относительно неизвестной функции $c(r)=\frac{1}{\frac{1}{c_0}+\frac{1}{r_0}-\frac{1}{r}}$. Запишем решение этого дифференциального уравнения

$$c(r)=\frac{1}{\frac{1}{c^0}-\int\limits_{r_0}^{r}[2Ey^2-2U(y)y^2-l(l+1)][\frac{1}{c_l^0}+\alpha(y)+\frac{1}{r_0}-\frac{1}{y}]^2/idy+\frac{1}{r_0}-\frac{1}{r}}. \quad (4)$$

Где величина $\alpha(y)$ неизвестная функция. Причем энергия состояния E меньше чем потенциальная энергия на бесконечности $\min_r U(r)<E<U(\pm\infty)$. Причем точке минимума потенциала соответствует координата r_0. В случае монотонного потенциала берется наименьшее, возможное значение r_0. В случае атома водорода, этот наименьший радиус равен размеру ядра. Подстановка этого решения в дифференциальное уравнение (3) приведет к равенству

$$\frac{[\frac{1}{c^0}+\alpha(r)+\frac{1}{r_0}-\frac{1}{r}]^2}{\{\frac{1}{c^0}-\int\limits_{r_0}^{r}[2Ey^2-2U(y)y^2-l(l+1)][\frac{1}{c^0}+\alpha(y)+\frac{1}{r_0}-\frac{1}{y}]^2/idy+\frac{1}{r_0}-\frac{1}{r}\}^2}=1$$

Откуда имеем интегральное уравнение по определению функции $\alpha(r)$

$$\alpha(r)=-\int\limits_{r_0}^{r}[2Ey^2-2U(y)y^2-l(l+1)][\frac{1}{c^0}+\alpha(y)+\frac{1}{r_0}-\frac{1}{r}]^2/idy.$$

Которое сводится к дифференциальному уравнению

$$\frac{d\alpha(r)}{dr}=-[-2Er^2+2U(r)r^2+l(l+1)][\frac{1}{c^0}+\alpha(y)+\frac{1}{r_0}-\frac{1}{r}]^2/i$$

Начальное условие задачи Коши для этого дифференциального уравнения $\alpha(r_0)=0$.

При этом волновая функция равна $\psi_l(r,t) = \exp\{-i[Et/\hbar - \int\limits_{r_0}^{r} k(u)du]\}$, и зависит от двух констант c_l^0, E.

Для реализации состояния ищется минимум действия. Действие должно иметь минимум. Для реализации минимума действия при импульсе, удовлетворяющем условию (4), необходимо $k = \frac{1}{r^2}$. Тогда действие равно $S = -1/r$ и в точке $r = 0$ стремится к минус бесконечности, т.е. реализуется минимум. Из нуля знаменателя в точке минимума действия при условии $c \to \infty$ в формуле (4) получаем

$$2E = \frac{\frac{1}{c^0} + \int\limits_{r_0}^{r} [2U(y)y^2 + l(l+1)][\frac{1}{c_l^0} + \alpha(y) + \frac{1}{r_0} - \frac{1}{y}]^2 / idy + \frac{1}{r_0} - \frac{1}{r}}{\int\limits_{r_0}^{r} 2y^2[\frac{1}{c_l^0} + \alpha(y) + \frac{1}{r_0} - \frac{1}{y}]^2 / idy} =$$

Определяем координату r и начальный импульс c^0, чтобы числитель и знаменатель дроби равнялся нулю, причем эти значения возможно комплексные. При этом определится величина начального значения c^0

$$\frac{1}{c^0} = -b \pm \sqrt{b^2 - c}; c^0 = (-b \mp \sqrt{b^2 - c})/c$$

$$b = \frac{-4\int\limits_{r_0}^{r} y^2[\alpha(y) + \frac{1}{r_0} - \frac{1}{r}]dy}{(r^2 - r_0^2) - \frac{2}{3}\frac{(r^3 - r_0^3)}{r_0}}; c = \frac{-\int\limits_{r_0}^{r} 2y^2[\alpha(y) + \frac{1}{r_0} - \frac{1}{r}]^2 dy}{r^2 - r_0^2 - \frac{2}{3}\frac{r^3 - r_0^3}{r_0}}.$$

Подставляем значение импульса в числитель, получим одно уравнение с одним неизвестным r

$$b \pm \sqrt{b^2 - c} + \int\limits_{r_0}^{r} [2U(y)y^2 + l(l+1)][b \pm \sqrt{b^2 - c} + \alpha(y) + \frac{1}{r_0} - \frac{1}{r}]^2 / idy + \frac{1}{r_0} - \frac{1}{r} = 0$$

Интеграл от корня $\sqrt{b^2 - c}$ содержит функцию, зависящую от целого числа. При этом величина корня равна $\sqrt{b^2 - c} = (r - r_0)\sqrt{P(r)}$, где $P(r)$ удовлетворяет $P(r) \neq 0$. Значит, величина r зависит от целого числа, и имеем счетное количество комплексных корней.

Тогда значение энергии E определится по правилу Лопиталя, и будет равно (запишем ее в размерном виде)

$$E = U(r) + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2} + \frac{i\hbar^2 r_0^2}{2mr^4[1 + \frac{r_0}{c_l^0} + \alpha(r) r_0 - \frac{r_0}{r}]^2}.$$

Из этой формулы определится комплексная собственная энергия системы.

Литература

1. *Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М.* Квантовая механика Нерелятивистская теория т.III, Наука, М.,1969,768с.